

3次元 Helmholtz 方程式に対する境界要素法における L_1 最適化を用いたスパースな基底関数の生成についての 基礎的研究

A fundamental study on generating sparse basis functions using L_1 optimization for boundary element methods for the Helmholtz equation in 3D

新納和樹¹⁾池上明日香²⁾

Kazuki Niino and Asuka Ikegami

¹⁾京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: niino@i.kyoto-u.ac.jp)

²⁾京都大学大学院情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: ikegami@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

In this study, we consider a method for computing a small number of sparse basis functions that approximately represent given functions defined on a boundary. We show that sparse principal component analysis (SPCA) can be extended to the generation of basis functions by including the Gram matrix of the original basis functions. We also propose a formulation of SPCA, which is more natural from the aspect of mathematics. The basis functions generated by this method are used for solving problems of the Helmholtz equation in 3D. We verify the validity of the method by numerical calculations for some toy problems.

Key Words : sparse principal component analysis, boundary element method, Helmholtz equation

1. はじめに

境界要素法に現れる線形方程式の係数行列は密行列であり、大規模問題への適用に際して何らかの高速化法を用いる必要がある。高速化の手法の一つとして, characteristic basis function method (CBFM) と呼ばれる解きたい問題に特化した少数の基底関数を生成し、係数行列のサイズを圧縮する方法が知られている [1,2]。この方法では、一般に得られる基底関数の台が境界上に広く分布する。境界要素法を考える上で基底関数が境界上に広く台を有している場合、係数行列の各要素を計算する際に膨大な計算量が必要となるため、CBFM の様に数値的に基底関数を構成する際にはその台が小さく局所的であることが望ましい。

一方境界要素法に限らず、与えられた複数のデータや関数をよく表す少数の基底関数を数値的に導出する方法は、proper orthogonal decomposition[3] や principal component analysis (PCA)[4,5] と呼ばれ様々な分野で研究されている。特に sparse principal component analysis (SPCA)[6] は、PCA で扱う目的関数にパラメータの L_1 ノルムを正則化項として加えることで推定パラメータにスパース性を課す方法であるが、対象がベクトルに限定されているという問題がある。

そこで本研究では、領域境界で定義される複数の関数に対してそれらをよく表すスパースかつ少数の基底関数を数値的に導出する方法について考察する。SPCA において基底関数の Gram 行列を含む形の定式化を行うことで、SPCA を基底関数の生成に拡張できることを示す。また従来的な SPCA では、目的関数のパラメータにスパース性を要求する際に導入する追加のパラメータに対し妥当な説明が与えられていなかったが、本研究

では追加のパラメータと元のパラメータを双対基底と見なすことで自然に解釈が与えられることを示し、この解釈に従った定式化を提案する。またこの手法により得られた基底関数の、3 次元 Helmholtz 方程式を支配方程式とする transmission 問題への適用を定式化し、さらに小規模な問題に対して数値計算を行い、定式化の妥当性を検証する。

2. スパースな基底関数の生成

本節では、与えられた領域の境界上で定義される新しい基底関数の生成方法を提案する。まず、 L_1 正則化項を用いたスパース推定法として知られている SPCA について説明する。次に境界上で与えられた関数を少ない次元数で効率よく表現できるような新しい基底関数の生成を定式化し、最小化問題に帰着させる。そしてこの最小化問題の目的関数に L_1 正則化項を加え、SPCA の拡張として基底関数を求めるアルゴリズムを構築する。

(1) SPCA

最小化問題の推定パラメータにスパース性を課す手段として、目的関数に推定する行列の L_1 ノルムを加える方法が知られている [7]。次の最小化問題を考える。

$$\min_{\mathbf{A}} \|\mathbf{U}^H - \mathbf{U}^H \mathbf{A} \mathbf{A}^H\|_F^2 \quad (1)$$

subject to $\mathbf{A}^H \mathbf{A} = \mathbf{I}$

ここに、 $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{N \times s}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times m}$ である。式 (1) の最小化問題は行列 \mathbf{U} の各列ベクトルを最もよくあらわす m 本の正規直交基底を求める問題とみなせる。実際式 (1) は次

のように書き換える。

$$\|\mathbf{U}^H - \mathbf{U}^H \mathbf{A} \mathbf{A}^H\|_F^2 = \sum_i \|\mathbf{u}_i - \sum_j \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{a}_j \rangle \mathbf{a}_j\|_2^2$$

問題(1)の \mathbf{A} にスパース性を課す手法として, SPCA がある [6]. \mathbf{A} に直交制約を課し, かつ L_1 正則化項を加えた際, 効率的なアルゴリズムを構築することは容易ではない. そこで SPCA では, 新しいパラメータ $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times m}$ を用意し以下の最小化問題を考える.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{A}, \mathbf{B}} & \|\mathbf{U}^H - \mathbf{U}^H \mathbf{B} \mathbf{A}^H\|_F^2 + \sum_{k=1}^m \lambda_k \|\mathbf{b}_k\|_1 \\ \text{subject to } & \mathbf{A}^H \mathbf{A} = \mathbf{I} \end{aligned} \quad (2)$$

ただし $\mathbf{B} = (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_m)$ であり, λ_k は正のパラメータである. \mathbf{A} には直交制約 $\mathbf{A}^H \mathbf{A} = \mathbf{I}$ が, \mathbf{B} にはスパース性の制約 $\sum_k \lambda_k \|\mathbf{b}_k\|_1$ が課されている. SPCA は \mathbf{A}, \mathbf{B} の一方を固定し他方を最適化する更新を繰り返し, 最終的に \mathbf{B} の各列ベクトルを正規化して出力することで, 得られたベクトルがスパースかつ互いに直交に近い基底となる手法である.

(2) 基底関数の生成の最小化問題への帰着

なめらかな境界 Γ を有する有界領域 $\Omega \in \mathbb{R}^3$ を考える. $\psi_i(\mathbf{x})$, $(i = 1, 2, \dots, N)$ を境界 Γ 上で定義される N 個の区分線形基底とする. Γ 上で定義される与えられた s 個の関数を $u_j(\mathbf{x})$, $(j = 1, \dots, s)$ とし, 以下の最小化問題の解として m 個の新しい基底関数 $\phi_i(\mathbf{x})$, $(i = 1, \dots, m)$ を生成することを考える.

$$\min \sum_{j=1}^s \|u_j(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^m \langle u_j, \phi_k \rangle \phi_k(\mathbf{x})\|^2 \quad (3)$$

$$\text{subject to } \langle \phi_i, \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

ここに, $\langle u, v \rangle = \int_{\Gamma} \bar{u}(\mathbf{x}) \cdot u(\mathbf{x}) ds$ とする. 行列 $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ を区分線形基底のグラム行列 ($\mathbf{G})_{ij} = g_{ij} = \langle \psi_i, \psi_j \rangle$, $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{N \times s}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times m}$ をそれぞれ $u_i(\mathbf{x})$, $\psi_i(\mathbf{x})$ の区分線形基底に対する係数行列とする. すなわち

$$\begin{aligned} u_j(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^N (\mathbf{U})_{ij} \psi_i(\mathbf{x}), (j = 1, \dots, s) \\ \phi_j(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^N (\mathbf{A})_{ij} \psi_i(\mathbf{x}), (j = 1, \dots, m) \end{aligned}$$

である. これらを用いて, 最小化問題(3)は次式に帰着される. ただし上つき文字 H はエルミート転置を指す.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{A}} \text{tr} & \left(\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{U} - \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U} \right) \\ \text{subject to } & \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{A} = \mathbf{I} \end{aligned} \quad (4)$$

(3) L_1 正則化項によるスパース性

新しく生成する基底関数 $\phi_i(\mathbf{x})$ について, $\phi_i(\mathbf{x})$ を構成する区分線形基底の数を少なくする, すなわち行列 \mathbf{A} にスパース性を課すことを試みる. 本節ではまず SPCA の拡張として(4)の推定パラメータ \mathbf{A} にスパース性を課す定式化を行う. 次にこの定式化から発展して, 本稿での提案手法を定式化する.

a) SPCA の拡張

SPCA では二組の基底 $\mathbf{A} := (\phi_1^A, \phi_2^A, \dots, \phi_m^A)$, $\mathbf{B} := (\phi_1^B, \phi_2^B, \dots, \phi_m^B)$ を考え, 与えられた関数 $\mathbf{U} := (u_1, u_2, \dots, u_s)$ を \mathbf{B} との内積 $\langle u_i, \phi_j^B \rangle$ を係数として基底 \mathbf{A} で展開する近似を行い, その誤差を最小化する最適化を行っていると解釈できる. その際 \mathbf{A} を正規直交基底とし, \mathbf{B} をスパースかつ \mathbf{A} に近い基底となるよう構成している. SPCA の拡張として, $\mathbf{U}, \mathbf{A}, \mathbf{B}$ を区分線形基底の係数行列とすることを考える.

新しく構成する基底関数 $\phi_i^A(\mathbf{x}), \phi_i^B(\mathbf{x})$ について, $\phi_i^B(\mathbf{x})$ には区分線形基底の係数行列としてスパース性を課し, $\phi_i^A(\mathbf{x})$ は正規直交基底とする. つまり $\langle \phi_i^A, \phi_j^A \rangle = \delta_{ij}$ である. $u_j(\mathbf{x})$ を一組の直交基底のかわりに $\phi_i^A(\mathbf{x}), \phi_i^B(\mathbf{x})$ で展開することを考えると, 問題(3)に対応して次の最小化問題を得る.

$$\begin{aligned} \min & \sum_{j=1}^s \|u_j(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^m \langle u_j, \phi_k^B \rangle \phi_k^A(\mathbf{x})\|^2 \\ \text{subject to } & \langle \phi_i^A, \phi_j^A \rangle = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (5)$$

$\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times m}$ をそれぞれ, $\phi_i^A(\mathbf{x}), \phi_i^B(\mathbf{x})$ の区分線形基底に対する係数行列

$$\phi_j^A(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{A})_{ij} \psi_i(\mathbf{x}), (j = 1, \dots, m) \quad (6)$$

$$\phi_j^B(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{B})_{ij} \psi_i(\mathbf{x}), (j = 1, \dots, m) \quad (7)$$

とする. これらを用いて(5)の目的関数は次のように書き下すことができる.

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^s \|u_j(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^m \langle u_j, \phi_k^B \rangle \phi_k^A(\mathbf{x})\|^2 \\ &= \|\hat{\mathbf{U}}^H - \hat{\mathbf{U}}^H \mathbf{L}^H \mathbf{B} \hat{\mathbf{A}}^H\|_F^2 \end{aligned}$$

ここで, \mathbf{L} は \mathbf{G} をコレスキーフ分解した $\mathbf{G} = \mathbf{L} \mathbf{L}^H$ なる下三角行列であり, $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{L}^H \mathbf{A}$, $\hat{\mathbf{U}}^H = \mathbf{L}^H \mathbf{U}$ である. さらに \mathbf{B} に対して L_1 正則化項 $\sum \lambda_k \|\mathbf{b}_k\|_1$ を加え次式を得る.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{A}, \mathbf{B}} & \|\hat{\mathbf{U}}^H - \hat{\mathbf{U}}^H \mathbf{L}^H \mathbf{B} \hat{\mathbf{A}}^H\|_F^2 + \sum_{k=1}^m \lambda_k \|\mathbf{b}_k\|_1 \\ \text{subject to } & \hat{\mathbf{A}}^H \hat{\mathbf{A}} = \mathbf{I} \end{aligned} \quad (8)$$

SPCA と同様にして, $\hat{\mathbf{A}}, \mathbf{B}$ を交互に最適化する更新を繰り返し最終的に \mathbf{B} の各列ベクトルを正規化して出力することで, $\phi_i^B(\mathbf{x})$ が区分線形基底に対する係数がスパースな, 正規直交基底に近い基底として構成されることが期待される.

b) 提案手法

問題(5)は u_i を $\phi_i^B(\mathbf{x})$ への射影を係数として $\phi_i^A(\mathbf{x})$ で展開する近似を行い, その誤差を最小化していると解釈できるが, このような展開を考える際 $\phi_i^A(\mathbf{x}), \phi_i^B(\mathbf{x})$ は双対な基底, すなわち $\langle \phi_i^A, \phi_j^B \rangle = \delta_{ij}$ とすることが自然である. また新しく構成する基底は一次独立であれば十分で, 正規直交基底である必要はない. さらに, 最終的に採

用する基底関数は $\phi_i^B(\mathbf{x})$ であるから, u_i を ϕ_i^A への射影を係数として $\phi_i^B(\mathbf{x})$ で展開した近似の誤差を最小化することが自然である. 以上を踏まえ, $u_j(\mathbf{x})$ を一組の直交基底のかわりに双対な基底で展開することを考えると, 問題 (3) に対応して次の最小化問題を得る.

$$\begin{aligned} \min \sum_{j=1}^s \|u_j(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^m \langle u_j, \phi_k^A \rangle \phi_k^B(\mathbf{x})\|^2 \\ \text{subject to } \langle \phi_i^B, \phi_j^A \rangle = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (9)$$

式 (6), (7) を用いて式 (9) の目的関数を書き下し, さらに \mathbf{B} に対して L_1 正則化項 $\sum \lambda_k \|b_k\|_1$ を加え次式を得る.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{A}, \mathbf{B}} \text{tr}(\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{U} - \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U} - \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{U} \\ + \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U}) + \sum \lambda_k \|b_k\|_1 \\ \text{subject to } \mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{A} = \mathbf{I}, \|b_i\|_2 = 1 \quad (i = 1, \dots, m) \end{aligned} \quad (10)$$

ただし $\mathbf{B} = (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_m)$ であり, λ_k は正のパラメータである.

(4) アルゴリズム

(10) の最小化問題を解くためのアルゴリズムを示す. 本稿では, SPCA と同様に \mathbf{A}, \mathbf{B} の一方を固定した元で他方を更新することを交互に繰り返し \mathbf{A}, \mathbf{B} を決定する. 以下では, まず \mathbf{A}, \mathbf{B} の初期値について述べ, 次に \mathbf{A} を固定した元での \mathbf{B} の最適化, \mathbf{B} を固定した元での \mathbf{A} の更新について述べる. 最後に提案手法のアルゴリズムの全体をまとめると.

a) 初期値

\mathbf{A}, \mathbf{B} の初期値として, 正則化項 $\sum \lambda_k \|b_k\|_1$ を課さない問題 (4) の最適解 $\tilde{\mathbf{A}}$ を考える. $\tilde{\mathbf{A}}$ は次のように求まる. \mathbf{G} が区分線形基底のグラム行列であるから, $u_i(\mathbf{x})$ のグラム行列 $\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{U}$ はエルミート行列であり, 次のように特異値分解できる. $\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{U}$ の大きい順に m 個の特異値に対応する m 本の特異ベクトルからなる行列 $\mathbf{V}_L \in \mathbb{C}^{s \times m}$ を得る.

$$\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{U} = \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^H = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_L & \mathbf{V}_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_L & \\ & \boldsymbol{\Sigma}_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_L^H \\ \mathbf{V}_S^H \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_L$ は大きい順に並べた m 個の特異値を対角項にもつ m 次の対角行列, $\boldsymbol{\Sigma}_S$ は残りの特異値を対角項にもつ対角行列である. この \mathbf{V}_L を用いて,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{U} \mathbf{V}_L \boldsymbol{\Sigma}_L^{-\frac{1}{2}}$$

とすれば (4) の最適解が得られる. ただし, $\boldsymbol{\Sigma}_L^{-\frac{1}{2}}$ は $\boldsymbol{\Sigma}_L^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\Sigma}_L^{-\frac{1}{2}} = \boldsymbol{\Sigma}_L^{-1}$ なる各要素が正の実対角行列である. $\tilde{\mathbf{A}}$ の各列ベクトル $\tilde{\mathbf{a}}_i$ について $d_i := \|\tilde{\mathbf{a}}_i\|_2$, $\mathbf{D} := \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_m)$ とし, \mathbf{A}, \mathbf{B} の初期値を次のようにする.

$$\mathbf{A} := \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{D} \quad (11)$$

$$\mathbf{B} := \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{D}^{-1} \quad (12)$$

b) \mathbf{B} の推定

\mathbf{A} を固定した元で, 式 (10) を \mathbf{B} に関して最小化することを考える. \mathbf{B} の各要素に対する (10) の劣微分を求め, b_{ij} について以下の推定方程式を得る.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial b_{ij}} (\text{tr}(-\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{U}) + \text{tr}(\mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U})) + \lambda_j d \\ = -(\mathbf{G} \mathbf{U} \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A})_{ij} + (\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U} \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A})_{ij} + \lambda_j d \\ = -(\mathbf{E})_{ij} + (\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C})_{ij} + \lambda_j d = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

ただし, $\mathbf{E} = \mathbf{G} \mathbf{U} \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times m}$, $\mathbf{C} = \mathbf{A}^H \mathbf{G} \mathbf{U} \mathbf{U}^H \mathbf{G} \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ とする. また d は $\|\mathbf{b}_j\|_1$ を \bar{b}_{ij} で評価した際の劣微分であり, 以下で定義される.

$$d = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{b_{ij}}{\|\mathbf{b}_j\|_1} & b_{ij} \neq 0 \\ |\xi| < \frac{1}{2} \text{なる任意複素数} \xi & b_{ij} = 0 \end{cases} \quad (14)$$

式 (13) を解くにあたり, 本稿では座標降下法を採用する. つまり \mathbf{B} の $N \times m$ 個のパラメータのうち, b_{ij} 以外のパラメータをすべて固定した元で式 (13) を満たす b_{ij} を求め更新する. この更新を \mathbf{B} の全ての要素について行うことを \mathbf{B} が収束条件を満たすまで繰り返す.

いま, ある反復で更新を行う前の $(\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C})_{ij}$ の値を $(\widetilde{\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C}})_{ij}$, b_{ij} の値を \tilde{b}_{ij} とすると式 (13) は

$$-e_{ij} + (\widetilde{\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C}})_{ij} - g_{ii} \tilde{b}_{ij} c_{jj} + g_{ii} b_{ij} c_{jj} + \lambda_j d = 0$$

$$\begin{aligned} b_{ij} &= \frac{1}{g_{ii} c_{jj}} (e_{ij} - (\widetilde{\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C}})_{ij} + g_{ii} \tilde{b}_{ij} c_{jj} - \lambda_j d) \\ &= \frac{1}{g_{ii} c_{jj}} (r - \lambda_j d) \end{aligned}$$

となる. ただし $r = e_{ij} - (\widetilde{\mathbf{G} \mathbf{B} \mathbf{C}})_{ij} + g_{ii} \tilde{b}_{ij} c_{jj}$ である. これと式 (14) から, b_{ij} を次のように更新する.

$$b_{ij} = \begin{cases} 0 & |r| \leq \frac{\lambda_j}{2} \\ \left(\frac{|r| - \frac{\lambda_j}{2}}{g_{ii} c_{jj}} \right) \frac{r}{|r|} & |r| > \frac{\lambda_j}{2} \end{cases} \quad (15)$$

式 (15) によって全ての b_{ij} を順に更新することを \mathbf{B} が収束条件を満たすまで繰り返し, 最後に \mathbf{B} の各列ベクトル \mathbf{b}_i を正規化して反復を終了する.

c) \mathbf{A} の更新

\mathbf{B} を固定した元で \mathbf{A} を求める. $\mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{A} = \mathbf{I}$ から \mathbf{B} に対して \mathbf{A} は次の操作で一意に定まる.

$$\mathbf{A} = \mathbf{G} \mathbf{B} (\mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{B})^{-1} \quad (16)$$

d) 全体のアルゴリズム

本節で示したアルゴリズムをまとめたものが Algorithm 1 である. なお, \mathbf{A} を固定した元で \mathbf{B} を最適化する際の収束判定は, \mathbf{B} の $N \times m$ 個の要素を 1 回ずつ更新する前のものを \mathbf{B}' とし, 更新後の \mathbf{B} について $\frac{1}{m} \|\mathbf{B} - \mathbf{B}'\|_F$ の値で評価する. またアルゴリズム全体の収束判定は, \mathbf{B} を最適化する反復が終了し, 正規化を行ったものを \mathbf{B}'' とし, \mathbf{A} を更新した後もう一度最適化の反復を行い正規化した \mathbf{B} について $\frac{1}{m} \|\mathbf{B} - \mathbf{B}''\|_F$ の値で評価する. Algorithm 1 において, \mathbf{B} の全ての要素を一回ずつ更新することを 1 反復とする反復を内側の反復, \mathbf{B} を最適化し \mathbf{A} を更新することを 1 反復とする反復を外側の反復と呼ぶこととする.

Algorithm 1 最小化問題 (10)

```

1: 式 (11),(12) に従い  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  に初期値を入力する
2: while do
3:    $\mathbf{B}' := \mathbf{B}$ 
4:    $\lambda_k$  の値を更新する
5:   while do
6:      $\mathbf{B}'' := \mathbf{B}$ 
7:     式 (15) に従って  $\mathbf{B}$  の全ての要素を順に 1 回ずつ更新する
8:     if  $\frac{1}{m} \|\mathbf{B} - \mathbf{B}''\|_F < \epsilon_2$  then
9:       break
10:    end if
11:   end while
12:    $\mathbf{B}$  の各列ベクトルを正規化する
13:   if  $\frac{1}{m} \|\mathbf{B} - \mathbf{B}''\|_F < \epsilon_1$  then
14:     break
15:   end if
16:   式 (16) に従って  $\mathbf{A}$  を更新する
17: end while
18:  $\mathbf{B}$  を出力する

```

e) 正則化パラメータ λ_i についての注意

素朴な SPCA の実装では正則化パラメータ λ_i は定数とされているが, b_{ij} の更新式 (15) からわかるように, 本手法では十分大きな λ_j に対して $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$ となる場合がある. $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$ となると \mathbf{A} の更新式 (16) の $(\mathbf{B}^H \mathbf{G} \mathbf{G} \mathbf{B})^{-1}$ が存在せずアルゴリズムが破綻する. よって本手法では, \mathbf{A} を固定し \mathbf{B} を最適化する反復の開始時に適当な方法で λ_i を更新することとする. 具体的には更新方法は 5. 節で検討する.

3. 対象とする問題と定式化

本節では, 本稿で扱う 3 次元 Helmholtz 方程式を支配方程式とする transmission 問題を定義し, この問題に対する境界積分方程式の定式化, 離散化を行う.

3 次元の無限領域の中に滑らかな境界 Γ を持つ有界領域 Ω_2 を考え, その外部を $\Omega_1 = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega_2}$ とする. この時, それぞれの領域において Helmholtz 方程式

$$(\Delta + k_i^2)u(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega_i, \quad i = 1, 2$$

を満たす $u(\mathbf{x})$ を, 境界 Γ 上での境界条件

$$\begin{aligned} u_1(\mathbf{x}) &= u_2(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma \\ q_1(\mathbf{x}) &= q_2(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma \end{aligned}$$

および, Ω_1 での散乱波 $u^{sca} = u - u^{inc}$ の放射条件のもとで求める. ただし, $u_i(\mathbf{x})$ は Ω_i 上の $u(\mathbf{x})$ の Γ への極限であり,

$$q_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}}$$

である. また ε_i は領域 Ω_i で定義される定数である. \mathbf{n} は Γ から Ω_1 に向いた単位法線ベクトルとする. u^{inc} は入射波である.

この問題に対する PMCHWT 定式化による境界積分方程式を区分線形基底を用いたガラーキン法により離散化し, 次の線形方程式を得る. ただし, 境界 Γ を要素数 N の三角形メッシュで近似し, その上で定義される区分線形基底を $\psi_m(\mathbf{x})$ ($m = 1, 2, \dots, N$) とする.

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{f} \quad (17)$$

$\mathbf{A}, \mathbf{x}, \mathbf{f}$ は以下の通りである.

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_{i=1,2} \begin{pmatrix} \mathbf{D}_i & -\varepsilon_i \mathbf{S}_i \\ \frac{1}{\varepsilon_i} \mathbf{N}_i & -\mathbf{D}_i^* \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2N \times 2N} \\ \mathbf{x} &= (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N)^T \in \mathbb{C}^{2N} \\ \mathbf{f} &= \begin{pmatrix} -\mathbf{u}^{inc} \\ -\mathbf{q}^{inc} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2N} \end{aligned}$$

上付き文字 T は転置を表す. $\mathbf{S}_i, \mathbf{D}_i$ などはそれぞれ積分作用素を離散化したものであり, 次の通りである.

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_i)_{mn} &= \int_{\psi_m} \psi_m(\mathbf{x}) \int_{\psi_n} \psi_n(\mathbf{y}) G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS_y dS_x \\ (\mathbf{D}_i)_{mn} &= \int_{\psi_m} \psi_m(\mathbf{x}) \int_{\psi_n} \psi_n(\mathbf{y}) \frac{\partial G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}_y} dS_y dS_x \\ (\mathbf{D}_i^*)_{mn} &= \int_{\psi_m} \psi_m(\mathbf{x}) \int_{\psi_n} \psi_n(\mathbf{y}) \frac{\partial G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}_x} dS_y dS_x \\ (N_i)_{mn} &= \int_{\psi_m} \psi_m(\mathbf{x}) \int_{\psi_n} \psi_n(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}_y \partial \mathbf{n}_x} dS_y dS_x \end{aligned}$$

$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_x}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_y}$ はそれぞれ Γ 上の \mathbf{x}, \mathbf{y} における法線微分を表す. さらに, $G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は 3 次元 Helmholtz 方程式の基本解であり, 次のように表される.

$$G_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\exp(ik_i|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

ここで i は虚数単位である.

$\alpha_m, \beta_m \in \mathbb{C}$ ($m = 1, 2, \dots, N$) は $u(\mathbf{x}), q(\mathbf{x})$ を以下のように近似した際の未知係数である.

$$u(\mathbf{x}) \approx \sum_{m=1}^N \alpha_m \psi_m(\mathbf{x}), \quad q(\mathbf{x}) \approx \sum_{m=1}^N \beta_m \psi_m(\mathbf{x})$$

また, $\mathbf{u}^{inc}, \mathbf{q}^{inc}$ は以下の通りである.

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}^{inc})_m &= \int_{\psi_m} u^{inc}(\mathbf{x}) \psi_m(\mathbf{x}) dS_x \\ (\mathbf{q}^{inc})_m &= \int_{\psi_m} \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u^{inc}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \psi_m(\mathbf{x}) dS_x \end{aligned}$$

4. 新しい基底関数の生成と適用

本節では, 3. 節で得た線形方程式 (17) を解くにあたり, 2. 節で定式化した方法を用いて新しいスパースな基底関数を生成することを考える.

(1) 基底関数の生成

新しく生成する基底関数 ϕ_i^B に対する区分線形基底の係数行列 \mathbf{B} を構成するために事前に与えられる Γ 上で定義された関数 u_i として, 本稿では単位球面上に適当な間隔でサンプリングした s 本の平面波を入射波とする

問題に対する式(17)の解を使用する。 s 本の入射波に対し同時に解を求める場合、式(17)は次のように書ける。

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{F}, \quad \mathbf{X}, \mathbf{F} \in \mathbb{C}^{2N \times s} \quad (18)$$

\mathbf{F} は s 本の入射波それぞれに対応する、式(17)の右辺 \mathbf{f} が並んだ行列である。また \mathbf{U}, \mathbf{Q} を次のように定める。

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}, \mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{N \times s}$$

\mathbf{U}, \mathbf{Q} は、 s 本の入射波に対する線形方程式(17)を解くことで得られる s 個の解の、区分線形基底に対する係数行列である。

\mathbf{U}, \mathbf{Q} それぞれに対して、2.節で提案した方法を適用することで新しいスパースな基底関数 $\phi_i^u(\mathbf{x}), \phi_i^q(\mathbf{x})$ の区分線形基底に対する係数行列 $\mathbf{B}^u, \mathbf{B}^q$ を得る。

(2) 新しい基底関数を適用した線形方程式

$\mathbf{B}^q, \mathbf{B}^u$ を用いて式(17)の基底を変換する。まず、 $\mathbf{B}^{uq}, \mathbf{B}^{qu}$ を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{uq} &:= \begin{pmatrix} \mathbf{B}^u & \\ & \mathbf{B}^q \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2N \times 2m} \\ \mathbf{B}^{qu} &:= \begin{pmatrix} \mathbf{B}^q & \\ & \mathbf{B}^u \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2N \times 2m} \end{aligned}$$

次の式により、 $\mathbf{B}^{uq}, \mathbf{B}^{qu}$ を用いて、線形方程式(17)の基底を区分線形基底から $\psi_i^u(\mathbf{x}), \psi_i^q(\mathbf{x})$ に変換する。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{quH} \mathbf{A} \mathbf{B}^{uq} \mathbf{x}' &= \mathbf{B}^{quH} \mathbf{f} \\ \mathbf{B}^{quH} \mathbf{A} \mathbf{B}^{uq} &\in \mathbb{C}^{2m \times 2m} \\ \mathbf{x}', \mathbf{B}^{quH} \mathbf{f} &\in \mathbb{C}^{2m} \end{aligned} \quad (19)$$

\mathbf{x}' は線形方程式(17)の解を $\phi_i^u(\mathbf{x}), \phi_i^q(\mathbf{x})$ を基底として表した時の係数の組であり、次の式で元の区分線形基底 $\psi_i(\mathbf{x})$ の係数の組 \mathbf{x} を得る。

$$\mathbf{x} = \mathbf{B}^{uq} \mathbf{x}' \quad (20)$$

$\mathbf{B}^{quH} \mathbf{A} \mathbf{B}^{uq}$ は、行列 \mathbf{A} で積分作用素の離散化に用いている基底を、区分線形基底 $\psi_i(\mathbf{x})$ から $\phi_i^u(\mathbf{x}), \phi_i^q(\mathbf{x})$ に取り替えたものであると理解できる。

5. 数値計算

本節では4.節で提案した方法で新しい基底関数を構成する。また基底関数を新しいものに取り替えた(19)を解いた解と式(17)を素朴に解いた解との誤差や新しく構成した基底関数のスパース性を検証する。

(1) 問題設定

境界 Γ を、原点を中心とする直径1の球とする。 $k_1 = 0.25\pi, k_2 = \sqrt{\epsilon_r}k_1$ とし、 $\epsilon_r := \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = 3$ とする。この球に含まれる区分線形基底の数 N は $N = 425$ とした。また、サンプリングする入射波の間隔は、 θ 方向に $N_\theta = 4$ 分割、 ϕ 方向に $N_\phi = 8$ 分割し、平面波の伝播方向 (θ, ϕ) を次のようにする。

$$(\theta, \phi) = \left(\frac{\pi}{N_\theta} n_\theta, \frac{2\pi}{N_\phi} n_\phi \right) \quad (n_\theta = 1, \dots, N_\theta - 1, n_\phi = 0, 1, \dots, N_\phi - 1) \quad (21)$$

これと、 $(\theta, \phi) = (0, 0)$ を合わせ、 $s = 25$ とした。また、新しく生成する基底関数の数 m は $m = 9$ とした。線形方程式の反復解法にはGMRESを用い、許容誤差を 10^{-10} とした。

また、計算精度の検証にあたっては、基底を新しく生成したものに取り替えて解いた数値解 \mathbf{x} (式(20))を \mathbf{a} 、区分線形基底を用いた従来的な境界要素法の数値解(式(17)の解 \mathbf{x})を \mathbf{a}_t として、以下の式で与えられる相対誤差を用いた。

$$\eta = \frac{\|\mathbf{a} - \mathbf{a}_t\|_2}{\|\mathbf{a}_t\|_2}$$

全ての検証は、伝播方向が $(\theta, \phi) = \left(\frac{\pi}{10}, \frac{\pi}{10} \right)$ である平面波を入射波とする問題で行った。提案手法のアルゴリズムの収束判定については、 $\epsilon_1 = 10^{-3}, \epsilon_2 = 10^{-2}$ とした。

(2) λ_i の更新方法

本稿では、 \mathbf{A} を更新する毎に $\mu_j := \frac{1}{N} \sum_i |r_{ij}|$ を計算し、ある定数 $T > 0$ を与え正則化パラメータ λ_i を $\lambda_i = T \times \mu_i$ と更新する。ここで $r_{ij} := e_{ij} - (\mathbf{G}\mathbf{B}\mathbf{C})_{ij} + g_{ii}b_{ij}c_{jj}$ とする。

ただし \mathbf{B} の座標降下法実行時、始めの10反復までは毎回 λ_i を更新する。これは反復の開始直後は \mathbf{b}_i の変動が大きく、反復を始める前に決定した λ_i が \mathbf{b}_i に対して大きすぎて \mathbf{b}_i が0ベクトルになってしまことがあるためである。ここで1反復は \mathbf{B} の全ての要素を1回ずつ更新することを指す。

(3) 妥当性の検証

本節では、定数 T と生成された基底のスパース性や誤差 η の関係を検証する。図1, 2は \mathbf{Q} から生成した \mathbf{B}^q について、横軸を T 、縦軸をそれぞれ \mathbf{B}^q の $N \times m$ 個全ての要素のうちの0でない要素の割合、誤差 η としたグラフである。 T の増加に伴って、 \mathbf{B}^q はよりスパースになります。

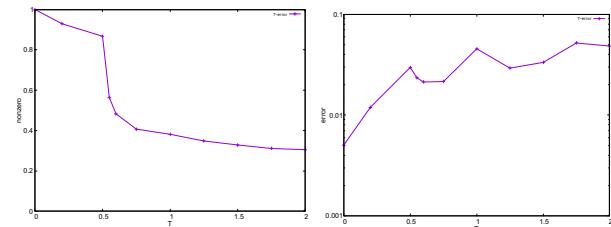


図-1 T の値と \mathbf{B}^q の非ゼロ要素の割合

図-2 T の値と誤差 η

誤差 η は大きくなっていることが確認できる。また図3は横軸が \mathbf{B}^q の列番号、縦軸が \mathbf{B} の各列ベクトルの非ゼロ要素の数である。 T の増加に伴って、各列の非ゼロ要素の数が均等に減少していることがわかる。また図4から図6は $T = 1.5$ とした時の各 ϕ_i^q のうち $\phi_1^q, \phi_2^q, \phi_3^q$ を構成する区分線形基底の頂点の位置を表したものである。各 ϕ_i^q の台が小さくなっていることがわかる。

(4) SPCAとの比較

本節では、提案手法により生成した新しい基底関数と、SPCAの拡張により生成した基底関数を比較する。なお、

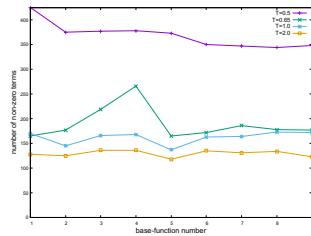
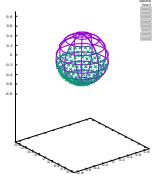
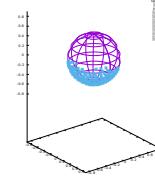


図-3 各列ベクトルの非ゼロ成分の数

図-4 ϕ_1^q の非ゼロ要素の位置図-5 ϕ_2^q の非ゼロ要素の位置図-6 ϕ_3^q の非ゼロ要素の位置

拡張した SPCA の正則化パラメータ λ_i の更新は次の通りに行う. SPCA のアルゴリズム内の \mathbf{b}_i の最小化問題

$$\min_{\mathbf{b}_i} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}_i\|_2^2 + \lambda_i \|\mathbf{b}_i\|_1$$

の座標降下法による b_{ji} の更新式

$$b_{ji} = \begin{cases} 0 & |r| \leq \frac{\lambda_i}{2} \\ \frac{1}{\mathbf{x}_j^H \mathbf{x}_j} \left(|r| - \frac{\lambda_i}{2} \right) \frac{r}{|r|} & |r| > \frac{\lambda_i}{2} \end{cases}$$

$$r = \mathbf{x}_j^H \left(\mathbf{y} - \sum_{k \neq j} b_k \mathbf{x}_k \right)$$

において, b_{ji} ($j = 1, 2, \dots, N$) についての $|r|$ の平均値 μ に定数 T を乗じた $\mu \times T =: \lambda_i$ で λ_i を定める. $\hat{\mathbf{A}}$ を更新する毎に全ての λ_i をこの方法で更新するものとする. ただし, $\mathbf{y} := \hat{\mathbf{U}}^H \hat{\mathbf{a}}_i$, $\mathbf{X} := \hat{\mathbf{U}}^H \mathbf{L}^H$ である.

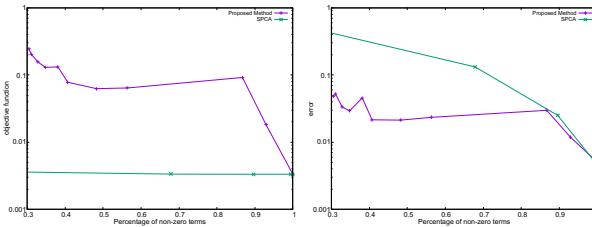
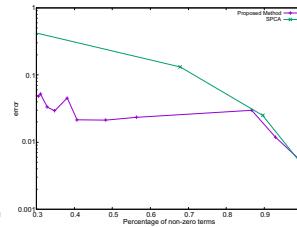
図-7 非ゼロ要素の割合と目的関数の値
(L_1 正則化項は除く)図-8 非ゼロ要素の割合と従来法との解の誤差 η

図 7 は横軸を \mathbf{B}^q の非ゼロ要素の割合, 縦軸を目的関数から L_1 正則化項を引いた値とした図である. 提案手法はスパース性が上がるに従って目的関数の値が増大しているのに対し, SPCA ではほとんど増加していない. これは SPCA ではベクトル \mathbf{b}_i を座標降下法により最適化しているのに対し, 提案手法では行列 \mathbf{B} を座標降下法で最適化していることに起因していると考察する. 一方

で図 8 から, 同程度のスパース性であれば提案手法で得た基底は拡張した SPCA のものよりも誤差 η が少ない結果となっている. これは拡張した SPCA の定式化において, \mathbf{B} が与えられた関数をよくあらわすように生成されるということに明確な妥当性がないことに由来していると考える.

6. 結論

本稿ではスパース推定の従来法を踏まえ, L_1 正則化項を用いて, 与えられた関数を効率よく表現できる少数かつスパースな基底関数の生成手法を提案し, この手法を 3 次元 Helmholtz 方程式を支配方程式とする境界要素法の高速化に適用した. また小規模な数値計算によって, 正則化パラメータを適切に与えることにより生成する基底のスパース性を操作できること, 実際に生成した基底の台の分布を確かめた. さらにこの基底をもとの基底と取り替えた線形方程式を解き, 素朴に解いた解との誤差を比較することで生成した基底の精度を検証した.

提案手法内での行列 \mathbf{B} の最適化に座標降下法を用いたが, よりよい最適化手法を検討する必要があると考える. また本稿では数値実験において境界 Γ を球面として与えたが, 対称性の低い, あるいは複雑な形状の境界に対して本手法の適用することは今後の課題である. さらに, 新しい基底関数を生成するためのデータとして平面波を入射波とした問題の解を複数与えたが, 全く異なる種類のデータを与えることでどのような基底関数が生成されるのか, その有用性を検討することも今後の課題であると考えている.

参考文献

- [1] V. Prakash, and R. Mittra, *Characteristic basis function method: a new technique for efficient solution of method of moments matrix equations*, Microw. Opt. Techn. Lett., vol.36, no.2, pp.95-100, 2003.
- [2] 池上明日香・新納和樹, 3 次元 Helmholtz 方程式に対する CBFM を適用した境界要素法についての基礎的研究, 計算数理工学論文集 Vol.22, pp.179-187, 2022
- [3] M. Kahlbacher and S. Volkwein, *Galerkin proper orthogonal decomposition methods for parameter dependent elliptic systems*, *Discussiones Mathematicae: Differential Inclusions, Control and Optimization*, 27, 95-117, 2007.
- [4] K. Pearson, *On lines and planes of closest fit to systems of points in space*, *Philosophical Magazine*, Vol.2, pp.559-572, 1901
- [5] H. Hotelling, *Analysis of a complex of statistical variables into principal components*, *Journal of Educational Psychology* 24: 417-441, 498-520, 1933
- [6] H. Zou, T. Hastie, and R. Tibshirani, *Sparse Principal Component Analysis*, *Journal of Computational and Graphical Statistics* 15(2), 265-286, 2006
- [7] R. Tibshirani, *Regression shrinkage and selection via the lasso*, *J.R.Statist.Soc.B* 58(1), 267-288, 1996